

ВЫСОКОТОЧНЫЕ РАСЧЕТЫ $E1$ -АМПЛИТУД ${}^{3,1}P_1^o \rightarrow {}^1S_0$ ПЕРЕХОДОВ В МАГНИИ, КАЛЬЦИИ И СТРОНЦИИ

С.Г.Порсёв, М.Г.Козлов, Ю.Г.Рахлина

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П.Константинова РАН
188300 Гатчина, Ленинградская обл., Россия

Поступила в редакцию 13 ноября 2000 г.

Проведены высокоточные расчеты $E1$ -амплитуд ${}^{3,1}P_1^o(ns np) \rightarrow {}^1S_0(ns^2)$ переходов в магнии, кальции и стронции, где $n = 3, 4, 5$, соответственно. Для приведенного матричного элемента оператора электрического дипольного момента $\langle {}^1P_1^o || d || {}^1S_0 \rangle$ получены следующие результаты: 4.03 (2) а.е. для Mg, 4.91 (7) а.е. для Ca и 5.28 (9) а.е. для Sr. Эти матричные элементы необходимы для вычисления ван-дер-ваальсовских коэффициентов C_6 . Знание этих коэффициентов требуется для нахождения длин рассеяния атомов, которые определяют динамику и стабильность бозе-эйнштейновского конденсата.

PACS: 31.20.-d, 31.20.Tz, 32.70.Cs

В данной работе мы провели высокоточные расчеты $E1$ -амплитуд ${}^{3,1}P_1^o(ns np) \rightarrow {}^1S_0(ns^2)$ переходов в магнии, кальции и стронции, где $n = 3, 4, 5$, соответственно. Можно отметить следующие побудительные мотивы для проведения данных расчетов. Во-первых, это успехи, достигнутые в последнее время в области создания магнито-оптических ловушек. Захват атомов и последующее охлаждение позволяют изучать их взаимодействие при сверхнизких температурах. Большинство экспериментов было выполнено на щелочных атомах вследствие возможности достижения высоких плотностей и низких температур и наблюдения в таких системах бозе-эйнштейновского конденсата. Однако интерпретация экспериментальных данных для них весьма сложна и неоднозначна, в частности, из-за наличия у щелочных атомов сверхтонкой структуры в основном состоянии. Например, в недавно появившихся работах [1, 2] делаются взаимно противоположные выводы о возможности получения бозе-эйнштейновского конденсата цезия.

Притягательной особенностью двухвалентных атомов является то, что они имеют несколько изотопов с нулевым ядерным спином. Отсутствие в этом случае сверхтонкой структуры облегчает как экспериментальное, так и теоретическое изучение атомных взаимодействий. В свете того, что холодные ловушки были получены и для магния, и для кальция, и для стронция, новые возможности изучения в них межатомных взаимодействий и перспектива достижения бозе-эйнштейновского конденсата этих атомов обсуждается достаточно интенсивно (см., например, [3–5]).

Одним из основных параметров, характеризующих диполь-дипольное взаимодействие атомов в холодной ловушке, является дисперсионный (ван-дер-ваальсовский) коэффициент C_6 . Знание этого коэффициента требуется для нахождения длин рассеяния атомов, которые определяют динамику и стабильность бозе-эйнштейновского конденсата. Для определения C_6 требуется знать матричные элементы $E1$ -переходов из низколежащих нечетных состояний в основное (см., например, [6, 7]). Необходимо подчеркнуть, что в выражение для C_6 матричные элементы $\langle {}^{3,1}P_1^o || d || {}^1S_0 \rangle$ входят в 4-ой степени, а учитывая резонансный характер перехода

$^1P_1^o \rightarrow ^1S_0$ (соответствующая $E1$ -амплитуда дает вклад в $C_6 \sim 90\%$ [8]), становится ясно, что $E1$ -амплитуда этого перехода должна быть найдена с максимально высокой точностью.

Другой мотив заключается в следующем. Несмотря на то, что силы осцилляторов и времена жизни для состояний $^3P_1^o$ и $^1P_1^o$ находились уже неоднократно как теоретически, так и экспериментально [4, 9–12], результаты для всех трех атомов оказываются достаточно противоречивыми. В частности, расхождения между данными различных экспериментальных групп доходят до 70%. Таким образом, необходимость высокоточного расчета указанных $E1$ -амплитуд видится весьма своевременной и актуальной.

При вычислениях мы использовали метод, являющийся объединением наложения конфигураций (НК) и многочастичной теории возмущений (МТВ). Этот метод разрабатывался нашей группой в течение последних нескольких лет и был успешно применен для расчета энергий низлежащих уровней и различных наблюдаемых в ряде атомов [13]. Детальное описание метода дается в указанных работах, поэтому отметим лишь основные моменты. Используя МТВ, строим эффективные операторы (гамильтониан, оператор электрического дипольного момента и т.д.) для валентных электронов. При этом учитывается взаимодействие валентных электронов с остовными. Затем, если число валентных электронов два и более, с помощью метода НК учитывается их взаимодействие между собой. Подобный подход, позволяющий учесть как взаимодействие между валентными электронами, так и валентно-остовные корреляции, позволяет повысить на порядок точность вычислений энергий уровней и различных наблюдаемых по сравнению с чистым НК. Следует отметить, что этот метод особенно эффективен при высокоточных расчетах двухвалентных атомов. Во-первых, наличие только двух валентных электронов позволяет сделать полное наложение конфигураций. При этом число базисных функций берется настолько большим, чтобы ошибка, связанная с неполнотой базиса, была пренебрежимой. Тем самым проблемы недонасыщенности НК (обычной при большем числе валентных электронов) здесь не возникает. Во-вторых, из-за более компактного остова сходимость рядов теории возмущений здесь лучше, чем в случае щелочных атомов. В связи с этим уже учет второго порядка МТВ дает хорошую точность и для энергий, и для $E1$ -амплитуд.

Сказанное выше показывает, что метод, объединяющий НК и МТВ (НК+МТВ), как нельзя лучше подходит для данных расчетов. Мы опускаем детальное описание вычислений, которое будет дано в другой работе, и переходим к численным результатам для приведенных матричных элементов оператора электрического дипольного момента $\langle ^3,^1P_1^o || d || ^1S_0 \rangle$ для Mg, Ca и Sr. Для всех трех атомов мы для сравнения приводим результаты, полученные для двух случаев: чистого НК и НК+МТВ. Во втором случае мы полностью учли второй порядок и частично поправки высших порядков МТВ. На последнем следует остановиться особо. Дело в том, что уже на стадии вычисления поправок второго порядка к гамильтониану помимо одноэлектронных диаграмм необходимо вычислять и двухэлектронные, что является специфической особенностью использования МТВ для атомов с несколькими валентными электронами. Количество этих диаграмм очень велико ($> 10^7$), и даже для современных суперкомпьютеров их вычисление является весьма времязатратным делом. К счастью, вычислять все диаграммы необходимости нет, и обычно удается огра-

ничиться вычислением нескольких сотен тысяч диаграмм практически без потери точности. Однако отсюда понятно, что попытка напрямую учесть все диаграммы третьего порядка МТВ приведет к огромным техническим трудностям и едва ли осуществима на практике.

В связи с этим более разумным выглядит другой вариант – частично учесть высшие порядки МТВ косвенным способом. Один из таких способов, использованный и в данной работе, был предложен в статье [14], где, в частности, было показано, что выбором оптимального одноэлектронного гамильтониана можно существенно улучшить согласие между расчетным и экспериментальным спектрами многоэлектронных атомов. Оптимизированный эффективный гамильтониан используется в дальнейшем для расчета атомных наблюдаемых. При построении эффективного оператора электрического дипольного момента и на стадии вычисления $E1$ -амплитуд были решены уравнения приближения случайной фазы (в дальнейшем мы используем английскую аббревиатуру: RPA - random phase approximation) и сосчитаны одночастичные и двухчастичные поправки к RPA (включая поправки на нормировку волновых функций и на структурное излучение). Подробно эта процедура описана в работе [15]. Здесь лишь отметим, что решая уравнения RPA, мы эффективно суммируем определенную подпоследовательность диаграмм МТВ во всех порядках. Для всех трех атомов уравнения RPA решались при частоте $\omega = E(^1P_1^o) - E(^1S_0)$. Все расчеты проводились как в калибровке длины (L), так и в калибровке скорости (V), что позволило контролировать точность расчетов и помогло в оценке теоретической погрешности. Итоговые результаты приведены в таблице.

Приведенные матричные элементы $|\langle ^1,^3P_1^o || d || ^1S_0 \rangle|$ (а.е.), сосчитанные в L - и V -калибровках для Mg, Ca и Sr

Переход	Mg		Ca		Sr	
	НК	НК+МТВ	НК	НК+МТВ	НК	НК+МТВ
$^1P_1^o \rightarrow ^1S_0$						
L -калибровка	4.09	4.03	5.20	4.91	5.63	5.28
V -калибровка	4.07	4.04	5.11	4.89	5.48	5.32
Итоговое значение	4.03(2)		4.91(7)		5.28(9)	
Эксперимент	4.15(10) [9]		4.967(9) [4]		5.57(6) [10]	
	4.06(10) [17]		4.99(4) [10]		5.40(8) [18]	
	4.12(6) [19]		4.93(11) [20]			
$^3P_1^o \rightarrow ^1S_0$						
L -калибровка	0.0055	0.0064	0.027	0.034	0.123	0.161
V -калибровка	0.0062	0.0062	0.030	0.032	0.133	0.172
Итоговое значение	0.0064(7)		0.034(4)		0.161(16)	
Эксперимент	0.0053(3) [21]		0.0357(4) [22]		0.1555(16) [23]	
	0.0056(4) [24]		0.0352(10) [25]		0.1510(18) [25]	
	0.0061(10) [26]		0.0357(16) [27]		0.1486(17) [28]	

Примечание: экспериментальные значения матричных элементов получены пересчетом измеренных времен жизни $^1P_1^o$ и $^3P_1^o$ уровней, взятых из указанных работ. (Мы приводим те экспериментальные данные, где ошибки измерения оказались наименьшими.)

Анализируя полученные результаты, мы видим, что для перехода $^1P_1^o \rightarrow ^1S_0$, $E1$ -амплитуда которого не подавлена, различие между L - и V -калибровками составляет 0.3% для Mg, 0.5% для Ca и 0.8% для Sr. Для перехода $^3P_1^o \rightarrow ^1S_0$ соответствующие $E1$ -амплитуды малы. Этот переход идет с изменением полного спина S , и, как следствие, его амплитуда подавлена. Технически это связано с большими сокращениями

основных вкладов, которые определяются одноэлектронными матричными элементами $\langle np_{1/2} || d || ns \rangle$ и $\langle np_{3/2} || d || ns \rangle$ (где $n = 3, 4, 5$ для Mg, Ca и Sr, соответственно). Это, естественно, сказывается на точности вычислений. Тем не менее, и здесь результаты, полученные в L - и V -калибровках, совпадают на уровне 6%, что является вполне удовлетворительным. Матричный элемент оператора электрического дипольного момента в V -калибровке записывается так (мы пользуемся системой атомных единиц $\hbar = e = m = 1$):

$$\langle f | d | i \rangle = ic \langle f | \alpha | i \rangle / (E_i - E_f).$$

Здесь c – скорость света, E_i и E_f – энергии начального и конечного состояний, α – матрицы Дирака. Поэтому для получения хорошего результата в V -калибровке необходимо правильно сосчитать не только сами матричные элементы дипольного оператора, но и энергии уровней, между которыми идет переход. Для всех трех атомов энергии уровней $^3P_1^o$, $^1P_1^o$, 1S_0 были воспроизведены с очень высокой точностью ($\leq 0.1\%$).

Следует обратить внимание на то, что для всех 6 рассмотренных переходов (см. таблицу) результаты, полученные в V -калибровке на стадии НК, оказались ближе к окончательному ответу, чем в случае L -калибровки. К сожалению, это не дает возможности считать в данном случае V -калибровку более надежной. Несмотря на то, что результативно итоговый вклад МТВ меньше для калибровки скорости, происходит это за счет очень значительных сокращений между различными теоретико-возмущенческими поправками, каждая из которых численно в несколько раз больше, чем для калибровки длины. Вследствие этого, V -калибровка значительно более чувствительна к высшим поправкам МТВ, чем L -калибровка. Поэтому в качестве окончательных результатов расчета мы берем значения, полученные в калибровке длины.

Оценивая точность полученных результатов, заметим, что основная ошибка связана с невозможностью учесть МТВ во всех порядках. Как уже отмечалось ранее, НК является насыщенным и не приносит дополнительных ошибок. Таким образом, чем меньше поправка МТВ, тем меньше погрешность результата. Кроме этого, при оценке ошибки вычислений мы принимали во внимание близость результатов в L - и V -калибровках. Для перехода $^1P_1^o \rightarrow ^1S_0$ МТВ дает следующие поправки для $E1$ -амплитуд в L -калибровке: 1.6% для Mg, 5.5% для Ca и 6.4% для Sr (см. таблицу).

Наши окончательные значения для $|\langle ^1P_1^o || d || ^1S_0 \rangle|$, которые могут быть использованы для дальнейших расчетов (например, коэффициентов C_6) таковы: 4.03 (2) для Mg, 4.91 (7) для Ca и 5.28 (9) для Sr. Заметим, что для Ca была совсем недавно экспериментально найдена вероятность перехода $^1P_1 \rightarrow ^1S_0$: $2.205(8) \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$ [4], что в пересчете на соответствующую амплитуду перехода дает 4.967 (9) а.е. Экспериментальная точность 0.2% для $E1$ -амплитуды является беспрецедентной и значительно превосходит точность нашего расчета. Вместе с тем это дает нам возможность проверить надежность оценки точности наших вычислений. Что касается Mg и Sr, то для первого точность нашего результата выше экспериментальной, а для второго – на уровне лучших экспериментальных результатов.

Для переходов $^3P_1 \rightarrow ^1S_0$ вклад МТВ для L -калибровки, которую мы считаем более надежной, значительно больше. Кроме того, из-за больших сокращений основных вкладов (например, для магния оно составляет 99%) роль поправок высших порядков для этих переходов существенно выше. В частности, как было показано в работе [16],

учет брейтовского взаимодействия уменьшает амплитуду ${}^3P_1 \rightarrow {}^1S_0$ перехода для магния на величину $\sim 5\%$. Поэтому мы оцениваем погрешность вычисления этой $E1$ -амплитуды для всех трех атомов на уровне 10–12%.

В заключение еще раз отметим, что мы провели вычисления матричных элементов $\langle {}^3P_1^o || d || {}^1S_0 \rangle$ и $\langle {}^3P_1^o || d || {}^1S_0 \rangle$, сделав особый упор на высокоточный расчет синглет-синглетных переходов. Как и следовало ожидать, наилучшая точность получена для Mg (0.5%), для Ca она составила 1.4% и для Sr – 1.7%. Для магния достигнутая нами точность является лучшей в мире, а для кальция и стронция результаты являются лучшими среди теоретических работ. Как сказано выше, основная ошибка в наших расчетах связана с неполным учетом высших порядков МТВ. Второй порядок МТВ обычно завышает корреляционные поправки к различным наблюдаемым, поэтому мы полагаем, что наши результаты несколько ниже правильного значения для синглет-синглетных амплитуд, и выше – для синглет-триплетных. Для синглет-синглетных амплитуд это хорошо согласуется с экспериментальными данными. Как видно из таблицы, для всех трех атомов расчетные амплитуды оказались меньше экспериментальных. В дальнейшем мы планируем провести расчеты коэффициентов C_6 для магния, кальция и стронция, используя полученные в этой работе результаты.

Мы благодарны А.Деревянко за то, что он привлек наше внимание к этой задаче, а также за полезные замечания. Работа была частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант # 98-02-17663).

1. C.Drag, B.Laburthe-Tolra, B.T.Jampens et al., Phys. Rev. Lett. **85**, 1408 (2000).
2. P.L.Leo, C.J.Williams, and P.S.Julienne, Phys. Rev. Lett. **85**, 2721 (2000).
3. M.Machholm, P.S.Julienne, and K.-A.Suominen, Phys. Rev. **A59**, R4113 (1999).
4. G.Zinner, T.Binnewies, and F.Riehle, Phys. Rev. Lett. **85**, 2292 (2000).
5. T.P.Dinneen, K.R.Vogel, E.Arimondo et al., Phys.Rev. **A59**, 1216 (1999).
6. A.Derevianko, W.R.Johnson, M.S.Safronova, and J.F.Babb, Phys. Rev. Lett. **82**, 3589 (1999); A.Derevianko and A.Dalgarno, Phys. Rev. **A62**, 062501 (2000).
7. A.Dalgarno and W.D.Davidson, Adv. At. Mol. Phys. **2**, 1 (1966).
8. A.Derevianko, (private communication).
9. L.Liljeby, A.Lindgard, S.Mannervik et al., Phys. Scr. **21**, 805 (1980).
10. F.M.Kelly and M.S.Mathur, Can. J. Phys. **58**, 1416 (1980).
11. T.Brage, C.F.Fisher, N.Vaeck, and A.Gallagher, Phys. Scr. **48**, 533 (1993) (and references therein).
12. H.G.C.Werij, C.H.Greene, C.E.Theodosiou et al., Phys. Rev. **A46**, 1248 (1992).
13. V.V.Dzuba, V.V.Flambaum, and M.G.Kozlov, Phys. Rev. **A54**, 3948 (1996); S.G.Porsev, Yu.G.Rakhlina, and M.G.Kozlov, J. Phys. **B32**, 1113 (1999); S.G.Porsev, Yu.G.Rakhlina, and M.G.Kozlov, Phys. Rev. **A60**, 2781 (1999).
14. М.Г.Козлов, С.Г.Порсев, Опт. Спектроск. **87**, 384 (1999).
15. В.А.Дзюба, М.Г.Козлов, С.Г.Порсев, В.В.Фламбаум, ЖЭТФ **114**, 1636 (1998).
16. P.Jonsson and C.Froese Fisher, J. Phys. **B30**, 5861 (1997).
17. L.Lundin, B.Engman, J.Hilke, and I.Martinson, Phys. Scr. **8**, 274 (1973).
18. W.H.Parkinson, E.M.Reeves, and F.S.Tomkins, J. Phys. **B9**, 157 (1976).
19. W.W.Smith and A.Gallagher, Phys. Rev. **A145**, 26 (1966).
20. W.J.Hansen, J. Phys. **B16**, 2309 (1983).
21. A.Godone and C.Novero, Phys. Rev. **A45**, 1717 (1992).
22. D.Husain and G.J.Roberts, J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2 **82**, 1921 (1986).
23. D.Husain and J.Schifino, J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2 **80**, 321 (1984).
24. H.S.Kwong, P.L.Smith, and W.H.Parkinson, Rhys. Rev. **A25**, 2629 (1982).
25. R.Drozdzowski, M.Ignasiuk, J.Kwela, and J.Heldt, Z. Phys. **D41**, 125 (1997).
26. C.Mitchell, J. Phys. **B8**, 25 (1975).
27. P.G.Whitkop and J.R.Wiesenfeld, Chem. Phys. Lett. **69**, 457 (1980).
28. J.F.Kelly, M.Harris, and A.Gallagher, Phys. Rev. **A37**, 2354 (1988).